



وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوزنگ - زنجان



بررسی نظری ساختار الکترونی و ویژگی‌های شیمیایی

عایق توپولوژیکی دوبعدی بیسموت:

رهیافت نظریه‌ی تابعی چگالی

پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد

نفیسه فلسفی

استاد راهنما: دکتر فریبا نظری

استاد مشاور: دکتر سعید عابدین‌پور

خرداد ۱۳۹۳



تقدیم به کسانی که

از آنها زاده شدم و

کسی که از او جاودانه

استادی که سپیدی را بر تخته سیاه زندگیم نگاشت و

مادری که تار مویی از او بپای من سیاه نماند و

روح پاک پدرم که عالمانه به من آموخت تا ایستادگی را تجربه کنم.

سپاس

سپاس از **خدایی** که هر چه دارم از اوست، خدایی که این بنده ی کوچک را در دریای بیکران علم، همچون قطره ای ساخت تا وسعت آن را از دریچه ی اندیشه های ناب **معلمانی** بزرگ تماشا کند.

سپاس از تمام کسانی که نامشان رزق روح شده، جراتم می بخشد و روشنم می دارد.....

از استاد عزیز و مهربانم **دکتر فریبا نظری** بخاطر سعه ی صدر و رهنمون های دلسوزانه شان، کسی که در لحظه لحظه ی تحصیل پشتیبان و راهنمایم بود، آموخت مرا تا پیاموزم و هرگز محبت مادرانه ی خود را از من دریغ نکرد.

و از اساتید گرامی **دکتر عابدین پور** و **دکتر قربان زاده** که زحمت مشاوره ی این پایان نامه را متحمل شدند.

سپاس از **مادرم**، نازنین یار بی صدای شب های پرتلاطم زندگی ام که نه می توانم موهایش را که در راه عزت من سفید شدند، سیاه کنم و نه برای دست هایش که در راه افتخار من پینه زدند مرهمی باشم.

و تقدیم به روح **بزرگوار پدرم** که چون مشعل امیدبخش مسیر پرپیچ و خم زندگی ام بود .

از دوستان عزیزم **خانم نرجس انصاری** و **الهام آشوری** هم به خاطر همه ی راهنمایی هایشان سپاسگذارم.

و در آخر نیز از تمام کسانی که نفس خیرشان، بدرقه ی راهم بود سپاس گذارم.



چکیده

امروزه بیسموت با برهم‌کنش اسپین-مدار قوی و ساختاری لایه‌ای متشکل از دولایه‌ها، توجه زیادی را به سوی خود جلب کرده است. به منظور شناسایی ویژگی‌های ذاتی و آشنایی با عملکرد متفاوت گونه‌های مختلف (به‌خصوص گونه‌های محیطی) با به‌کارگیری نظریه‌ی تابعی چگالی برهم‌کنش اتم اکسیژن (به‌عنوان یک گونه‌ی محیطی) و اتم مغناطیسی پلاتین با نانو نوار زیگزاگ بیسموت (۱۲×۱) بررسی شده است. لازم به یادآوری است که سامانه‌ی بیسموت در ابعاد متفاوت دارای ویژگی‌های مختلفی است. به‌طوری‌که در سامانه‌ی شبه‌فلزی سه‌بعدی بیسموت با کاهش بعد، گستره‌ای از ویژگی‌های نارسانایی تا شبه‌فلزی در سامانه‌های متشکل از دولایه‌های آن دیده می‌شود. با انتخاب سامانه‌ای با بزرگ‌ترین شکاف نواری از میان سامانه‌های دوبعدی یاد شده و کاهش مجدد بعد آن، ویژگی توپولوژیکی دوبعدی (حالت‌های لبه و اتصال آن‌ها از طریق مخروط دیراک) نیز با افزایش اندازه‌ی نانونوار تا عرض ۱۲×۱ مشاهده شده است. ویژگی توپولوژیکی این نانونوار پس از انجام تعدادی بررسی (شامل توزیع چگالی بار نوارهای مرزی و اشباع شدن پیوندهای آزاد در لبه) مورد تایید قرار گرفته است. گزینش اتم اکسیژن و اتم مغناطیسی پلاتین نیز پس از بررسی جذب چندین اتم در سامانه‌ی دوبعدی بیسموت و ساختار نواری حاصل از آن‌ها صورت گرفته است. نتیجه‌ی بررسی‌ها گزینش موقعیت جانشینی را به‌وسیله‌ی اتم پلاتین و موقعیت پل را نیز توسط اتم اکسیژن و در هر دو حالت با جذب شیمیایی نشان می‌دهد. از سوی دیگر جذب گونه‌های جاذب پلاتین و اکسیژن در سامانه‌ی توپولوژیکی مربوطه، به‌ترتیب با جذب بار نسبت به خود و دفع آن، موجب القای ویژگی فلزی و ابقای ویژگی نارسانایی در توده‌ی دوبعدی عایق مربوط به نانونوار توپولوژیکی شده است. با ادامه‌ی بررسی‌های مربوط به آلییدن نانونوار یک‌بعدی نیز ویژگی متفاوتی از سوی هر دو اتم پلاتین و اکسیژن مشاهده شده است.

فهرست مطالب

صفحه	عنوان
	فصل اول
	مقدمه‌ی عمومی
۱	۱.۱ مقدمه
۱۰	مراجع
	فصل دوم
	روش‌های محاسباتی
۱۲	۱.۲ مقدمه
۱۸	۲.۲ نظریه‌ی تابعی چگالی
۲۲	۱.۲.۲ تقریب چگالی موضعی (ال‌دی‌ای)
۲۳	۲.۲.۲ تقریب شیب چگالی تعمیم‌یافته (جی‌جی‌ای)
۲۵	۳.۲ آستانه یا حد انرژی
۲۷	۴.۲ فضای معکوس و نقطه‌های K
۲۹	۵.۲ تقریب پتانسیل مجازی
۳۲	۶.۲ محاسبه‌های بر پایه‌ی دی‌اف‌تی در سطح ترکیب‌های
۳۵	۷.۲ چگالی حالت‌های الکترونی
۳۶	۸.۲ چگالی موضعی حالت‌های الکترونی
۳۷	۹.۲ محاسبه‌هایی بر پایه‌ی دی‌اف‌تی با رفتار هم‌بستگی الکترونی تصحیح یافته
۳۷	۱۰.۲ محاسبه‌هایی بر پایه‌ی دی‌اف‌تی با برهم‌کنش‌های پراکندگی تصحیح یافته
۳۸	۱۱.۲ خطای خود برهم‌کنشی، سامانه‌هایی با الکترون‌های به‌شدت هم‌بسته
۳۹	۱۲.۲ نقطه‌های قوت و ضعف نظریه‌ی تابعی چگالی با استفاده از تابع پایه‌های موج تخت
۴۰	مراجع
	فصل سوم
	مروری بر کارهای گذشته
۴۲	۱.۳ مروری بر تاریخچه‌ی عایق‌های توپولوژیکی

صفحه	عنوان
۵۲	۲.۳ مروری بر کارهای صورت گرفته در زمینه‌ی عایق‌های توپولوژیکی سه‌بعدی.....
۵۵	۱.۲.۳ بررسی‌های تجربی در زمینه‌ی عایق‌های توپولوژیکی سه‌بعدی.....
۵۷	۲.۲.۳ بررسی‌های نظری صورت گرفته در رابطه با عایق‌های توپولوژیکی سه‌بعدی.....
۵۸	۳.۳ عایق‌های توپولوژیکی دوبعدی.....
۶۴	مراجع

فصل چهارم

نتیجه و بحث

۶۸	۱.۴ جزییات ساختاری بیسموت.....
۷۰	۲.۴ اصول محاسباتی.....
۷۱	۳.۴ نتایج.....
۷۱	۱.۳.۴ ساختارهای سه‌بعدی.....
۷۲	۱.۳.۴ الف) سلول واحد شش‌وجهی.....
۷۳	۱.۳.۴ ب) سلول واحد لوزوجهی.....
۷۵	۴.۴ ساختارهای دوبعدی.....
۸۲	۵.۴ ساختارهای یک‌بعدی.....
۸۳	۱.۵.۴ حذف اثر اندازه‌ی کوانتومی و تحقق فاز عایق توپولوژیکی دوبعدی.....
۸۷	۲.۵.۴ اثبات رفتار عایق توپولوژیکی دوبعدی در نانو نوار 1×12 -ZBNR.....
۸۷	۱.۲.۵.۴ مشاهده‌ی رفتار عایق در توده‌ی نانو نوار 1×12 -ZBNR.....
۸۸	۲.۲.۵.۴ منشا حالت‌های لبه.....
۹۰	۳.۲.۵.۴ رفتار متفاوت اتم‌های لبه و توده در نمودارهای پی‌دی‌اواس.....
۹۰	۴.۲.۵.۴ رفتار غیر بدیهی حالت‌های لبه.....
۹۲	۵.۲.۵.۴ نمایش توزیع چگالی بار در حالت‌های لبه‌ی نانو نوار ZBNR.....
۹۳	۶.۲.۵.۴ نمایش توزیع چگالی بار در حالت‌های موجود در سطح فرمی ZBBu.....
۹۴	۷.۲.۵.۴ بررسی توزیع چگالی بار حالت‌های توده در ساختار نواری ZBNR.....
۹۶	۸.۲.۵.۴ بررسی توزیع بار لادین به‌عنوان معیار دیگری بر توجیه رفتار متفاوت.....
۹۶	۳.۵.۴ شناخت بیش‌تر نانو نوارهای بیسموت.....

صفحه	عنوان
۹۷	۴.۵.۴ شناخت جایگاه‌های فعال سطح نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$ و انتخاب مناسب‌ترین اتم برای آلییدن آن.....
۱۰۰	۵.۵.۴ جای‌گیری اتم پلاتین در سامانه‌ی $ZBBu-12 \times 1$
۱۰۳	۶.۵.۴ بررسی رفتار اتم پلاتین جای‌گیری شده در سامانه‌ی $ZBNR-12 \times 1$
۱۰۵	۷.۵.۴ آلییدن سامانه‌ی $ZBBu-12 \times 1$ به‌وسیله‌ی اتم اکسیژن.....
۱۰۹	۸.۵.۴ بررسی رفتار اتم اکسیژن جای‌گیری شده در سامانه‌ی $ZBNR-12 \times 1$
۱۱۱	نتیجه‌گیری.....
۱۱۳	مراجع.....
۱۱۵	پیوست الف.....
۱۱۷	پیوست ب.....

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۲۵	شکل (۱.۲) طبقه‌بندی مفید از تابعی‌ها که توسط پردیو و همکارانش ارایه شده است.....
۲۸	شکل (۲.۲) سمت چپ: فضای معکوس و راست ناحیه‌ی بریلوین مربوط به شبکه‌ی مکعبی.....
۲۹	شکل (۳.۲) یک شبکه‌ی مکعبی به همراه شانزده نقطه‌ی k در ناحیه‌ی بریلوین و ناحیه‌ی بریلوین کاسته که دارای سه نقطه‌ی k متمایز است.....
۳۰	شکل (۴.۲) سه حالت s با کم‌ترین انرژی مربوط به اوربیتال‌های اتم هیدروژن.....
۳۱	شکل (۵.۲) تصویر پتانسیل تمام الکترون (خط‌های پر) و پتانسیل مجازی (خط‌های نقطه‌چین) به همراه تابع موج مربوط به هر یک.....
۳۳	شکل (۶.۲) تصویر سطحی با شاخص‌های میلر (110) است.....
۳۴	شکل (۷.۲) موقعیت‌های جذبی متفاوت شامل موقعیت سر، پل، حفره‌ی چهارتایی و سه‌تایی به-صورت شماتیک در یک سطح نوعی نشان داده شده است.....
۳۴	شکل (۱.۳) تبدیل فنجان به دونات (دو شکل هم‌ارز توپولوژیک که دارای تعداد حفره‌ی یکسان هستند) را طی ده مرحله نشان می‌دهد.....
۴۳	شکل (۲.۳) الف) اثر کوانتومی هال را نشان می‌دهد و ب) نیز ساختار نواری این سامانه با حالت-های لبه‌ی هادی در شکاف نواری توده‌ای.....
۴۴	شکل (۳.۳) الف) حالت‌های مرزی و ب) توزیع انرژی یک عایق توپولوژیکی یک‌بعدی.....
۴۷	شکل (۴.۳) الف) ساختار عایق توپولوژیکی دوبعدی و جریان‌های اسپینی خالص و ب) نیز ساختار نواری آن را به همراه حالت‌های لبه‌ی اسپین-قطبیده‌ی هادی نشان می‌دهد.....
۴۷	شکل (۵.۳) الف) نوارهای انرژی توده‌ی کادمیوم تلورید عایق با شکاف نواری بزرگی در حدود $1/6$ الکترون‌ولت و ب) نوارهای انرژی توده‌ی جیوه تلورید با ساختار نواری وارونه. پ) وارونگی نوارهای چاه کوانتومی سه‌تایی در ضخامت‌های بالای حد بحرانی و نوارهای نرمال در ضخامت‌های پایین حد بحرانی.....
۴۹	شکل (۶.۳) الف) سطوح دوبعدی فلزی در یک عایق توپولوژیکی سه‌بعدی و ب) ساختار نواری اسپینی حالت‌های سطحی.....
۵۰	شکل (۷.۳) حالت‌های سطحی الف) غیر بدیهی عایق توپولوژیکی بیسموت سلنید با رابطه‌ی خطی و ب) بدیهی طلا که دارای رابطه‌ی سهموی است.....
۵۰	شکل (۸.۳) پدیده‌ی خم‌شدگی نوار را نشان می‌دهد.....
۵۴	

عنوان

صفحه

۵۶	شکل (۹.۳) عایق توپولوژیکی بیسموت سلنید آلاینده به وسیله‌ی ناخالصی غیر مغناطیسی (تالیم).....
۶۱	شکل (۱۰.۳ الف) ساختار بلوری سلول واحد شش وجهی بیسموت، متشکل از سه دولایه‌ای.....
۶۹	شکل (۴.۱) سلول واحد توده‌ی بیسموت در دو ساختار شش وجهی به رنگ دایره‌های قرمز و لوزوجهی به رنگ دایره‌های زردرنگ.....
۷۲	شکل (۲.۴) ناحیه‌های بریلوین مربوط به شبکه‌ی الف) شش وجهی و ب) لوزوجهی. پ) ساختار اتمی سلول واحد شش وجهی و ت) ساختار اتمی سلول واحد لوزوجهی.....
۷۳	شکل (۳.۴) نمودارهای مربوط به بهینه‌سازی الف) و ب) پارامترهای شبکه‌ی a و c، آستانه‌ی انرژی جنبشی پ) با لحاظ کردن اس اوسی و ت) بدون لحاظ کردن این برهم‌کنش ث) بهینه‌سازی تعداد نقطه‌های k در سلول واحد HBBu.....
۷۴	شکل (۴.۴ الف) ساختار نواری توده‌ی شش وجهی بیسموت (HBBu) با لحاظ کردن اس اوسی. ب) بدون لحاظ کردن این برهم‌کنش. پ) ساختار نواری توده‌ی لوزوجهی (RBBu) با لحاظ کردن اس اوسی و ت) بدون لحاظ کردن این برهم‌کنش.....
۷۵	شکل (۵.۴) قسمت الف) نمودار چگالی حالت‌های الکترونی توده‌ی شش وجهی بیسموت (HBBu) با لحاظ کردن اس اوسی و ب) بدون لحاظ کردن این برهم‌کنش.....
۷۶	شکل (۶.۴) ساختارهای اتمی مربوط به سامانه‌های دوبعدی متشکل از دولایه‌های اتمی که دارای ضخامت‌های متفاوتی از یک تا ده، دولایه‌ی اتمی هستند.....
۷۷	شکل (۷.۴) ساختار نواری یک، دولایه‌ی از بیسموت با لحاظ کردن اس اوسی که در شکل الف) با انجام فرآیند آسایش و در شکل ب) بدون انجام این فرآیند صورت گرفته است.....
۷۸	شکل (۸.۴) ساختار نواری فیلم (۱۱۱) بیسموت با ضخامت‌های متفاوت الف) یک، ب) دو، پ) سه، ت) چهار، ث) پنج و ج) شش، چ) هفت، ح) هشت، خ) نه، د) ده، دولایه‌ای.....
۷۹	شکل (۹.۴ الف) ساختار توده‌ی شش وجهی بیسموت. ساختارهای اتمی ب) و پ) ساختار دولایه‌ی اتمی اول بیسموت، ت) و ث) ساختار دولایه‌ی اتمی دوم و ج) و چ) ساختار دولایه‌ی اتمی سوم که از نمای پهلو و بالا نشان داده شده‌اند.....
۸۰	شکل (۱۰.۴ الف) ساختار نواری بدون لحاظ کردن اس اوسی برای دولایه‌ی اول و دوم و سوم بیسموت که به ترتیب از ساختار توده‌ی بیسموت در شکل (۸.۴ الف) بریده شده‌اند. ب) ساختار نواری آن‌ها با لحاظ کردن اس اوسی. پ) نمودار مربوط به دی‌اواس ساختارهای متشکل از یک، دولایه‌ی اتمی بدون لحاظ کردن اس اوسی و ت) با لحاظ کردن این برهم‌کنش.....

عنوان

صفحه

- شکل (۱۱.۴) الف) ساختار اتمی یک ابر سلول (3×3) HBBu از نمای بالا ب) ساختار ابر سلول
 ۸۲ را با شبکه‌ی لانه‌زنبوری مشابه با گرافن از نمای بالا نشان می‌دهد.....
- شکل (۱۲.۴) ساختار نانو نوار زیگزاگ ($ZBNR-M \times N$) با طول M و عرض N از نمای الف) پهلوی و ب) روبرو. ساختار نانو نوار دسته‌صندلی ($ABNR-M \times N$) با طول M و عرض N پ)
 ۸۲ از نمای پهلوی و ت) از نمای بالا.....
- شکل (۱۳.۴) ساختار نواری نانو نوار الف) $ZBNR-2 \times 1$ ب) $ZBNR-4 \times 1$ پ) $ZBNR-6 \times 1$
 ت) $ZBNR-8 \times 1$ ث) $ZBNR-10 \times 1$ ج) $ZBNR-12 \times 1$ چ) $ZBNR-9 \times 1$ ح) $ZBNR-10 \times 1$
 ۸۵ $ZBNR-12 \times 1$ و $ZBNR-12 \times 1$ برای مقایسه باهم کشیده شده‌اند.....
- شکل (۱۴.۴) حالت‌های لبه‌ی بدیهی و غیر بدیهی را در نانو نوارهای الف) 10×1 و ب) 12×1
 ۸۶ نشان می‌دهد.....
- شکل (۱۵.۴) الف) و ب) ساختار نواری دو نانو نوار کوچک با اندازه‌ی حداقل $ZBNR-2 \times 1$ و
 $ZBNR-4 \times 1$ پ) و ت) دو نانو نوار آخر ($ZBNR-10 \times 1$ و $ZBNR-12 \times 1$) که بدون لحاظ
 ۸۶ کردن اس‌اوسی رسم شده‌اند.....
- شکل (۱۶.۴) الف) ساختار نواری $ZBBu-12 \times 1$ بدون لحاظ کردن اس‌اوسی و ب) با لحاظ
 کردن این برهم‌کنش پ) نمودار دی‌اواس $ZBBu-12 \times 1$ بدون لحاظ کردن اس‌اوسی و ت) پی-
 ۸۸ دی‌اواس این ساختار بر روی اوربیتال‌های p و s و d تمام ۲۴ اتم $ZBBu-12 \times 1$ بدون اس‌اوسی
- شکل (۱۷.۴) ساختار نواری نانو نوارهای الف) $ZBNR-6 \times 1$ به صورت خالص و ب) اشباع‌شده
 با دو اتم هیدروژن و ساختار نواری نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$ پ) به صورت خالص و ت)
 ۸۹ اشباع‌شده با دو اتم هیدروژن.....
- شکل (۱۸.۴) پی‌دی‌اواس اوربیتال‌های p اتم‌های توده، میانی و لبه‌ی نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$
 ۹۰ مشخص شده در شکل بالایی نمودار.....
- شکل (۱۹.۴) طرح شماتیک از ساختار نواری یک عایق الف) معمولی (عایق توپولوژیکی بدیهی)
 ب) یک عایق توپولوژیکی دوبعدی (غیر بدیهی).....
 ۹۱
 ۹۱ شکل (۲۰.۴) ساختار نواری $ZBNR-12 \times 1$
- شکل (۲۱.۴) یک ساختار نواری شماتیک $Sb(111)$ متشکل از ۲۰ دولایه‌ی اتمی.....
 ۹۱
 شکل (۲۲.۴) ساختار نواری نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$ که حالت‌های لبه‌ی A و B را در انرژی
 ۹۲ فرمی نشان می‌دهد.....

عنوان

صفحه

- شکل (۲۳.۴) توزیع چگالی بار نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$ مربوط به حالت‌های لبه در نقطه‌های a_1 ، a_2 ، b_1 و b_2 در ساختار نواری نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$ ۹۲
- شکل (۲۴.۴) ساختار نواری سامانه‌ی دوبعدی، $ZBBu-12 \times 1$ به همراه دو نوار A (کمینه‌ی نواری هدایت) و B (بیشینه‌ی نواری ظرفیت) ۹۳
- شکل (۲۵.۴) توزیع چگالی بار سامانه‌ی دوبعدی $ZBBu-12 \times 1$ مربوط به پنج نقطه‌ی برگزیده از کمینه‌ی نواری هدایت a_1 ، a_2 ، a_3 ، a_4 و a_5 و نقطه‌های b_1 ، b_2 ، b_3 ، b_4 و b_5 مربوط به بیشینه‌ی نواری ظرفیت B ۹۴
- شکل (۲۶.۴) ساختار نواری نانو نوار زیگزاگ بیسموت با اندازه‌ی 12×1 که یکی از نوارهای توده‌ای در آن با رنگ آبی نشان داده شده است ۹۵
- شکل (۲۷.۴) توزیع چگالی بار سه نوار برگزیده از میان نوارهای ظرفیت ساختار نواری در نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$ ۹۵
- شکل (۲۸.۴) توزیع بار اتم‌های تشکیل‌دهنده‌ی نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$ برحسب فاصله از لبه‌ی نانو نوار ۹۶
- شکل (۲۹.۴) الف) و ب) ساختار اتمی نانو نوار $ZBNR-12 \times 1$ را از نمای پهلو و روبه‌رو قبل از انجام فرآیند آسایش پ) و ت) بازآرایی اتم‌های لبه در $ZBNR-12 \times 1$ پس از انجام فرآیند آسایش را نشان می‌دهد ۹۷
- شکل (۳۰.۴) بخشی از ساختار نانو نوار ($ZBNR-12 \times 1$) به همراه مکان‌های فعال سطحی با علامت‌های اختصاری T, B1, B2, H ۹۷
- شکل (۳۱.۴) الف) و ب) و پ) و ت) و ث) و ج) و ح) و خ) و د) و ذ) و ر) و ژ) و س) مربوط به آلییدن توده‌ی $ZBBu-12 \times 1$ به ترتیب با اتم‌های بور، کربن، فلورین، آهن و کروم، منگنز، نیتروژن، اسمیم، آنتیموان، تیتانیوم، قلع، لیتیم، پلاتین و اکسیژن است ۹۹
- شکل (۳۲.۴) نمودار انرژی جذب اتم پلاتین در ساختار $ZBBu-12 \times 1$ در موقعیت‌های مختلفی که در شکل (۲۹.۴) مشخص شده است ۱۰۰
- شکل (۳۳.۴) الف) ساختار نواری ساختار $ZBBu-12 \times 1$ آلییده شده با اتم پلاتین بدون در نظر گرفتن اس‌اوسی و ب) دی‌اواس مربوط به $ZBBu-12 \times 1$ آلییده شده با اتم پلاتین در جایگاه جانشینی به‌عنوان موقعیت پایدار جذبی ۱۰۱
- شکل (۳۴.۴) نمودار اختلاف بار اتم‌های $ZBBu-12 \times 1$ آلییده شده با پلاتین که تنها اختلاف به وجود آمده در اتم‌های اطراف پلاتین را نشان می‌دهد ۱۰۲

- شکل (۳۵.۴) قسمتی از ساختار ZBBu-12×1 آلاینده شده توسط پلاتین در موقعیت جانشینی به همراه موقعیت و شماره‌ی اتم‌های مختلف در ساختار آن را نشان می‌دهد. ۱۰۲
- شکل (۳۶.۴) اختلاف چگالی بار بین سامانه‌ی برهم‌کنشی سطح/اتم با سطح ZBBu-12×1 و اتم پلاتین تنها. ۱۰۲
- شکل (۳۷.۴) نمودار پی‌دی‌اواس مربوط به اتم‌های شماره‌ی الف (۲۵ پلاتین، ب) ۱۷ و پ) ۷ بیسموت در سامانه‌ی برهم‌کنشی ZBBu-12×1 با اتم پلاتین که با سامانه‌ی غیر برهم‌کنشی هم-ارز خود مقایسه شده است. ۱۰۳
- شکل (۳۸.۴) الف) ساختار نواری نانو نوار ZBNR-12×1 آلاینده شده در موقعیت پایدار جانشینی توسط اتم پلاتین که با لحاظ کردن اس‌اوسی رسم شده و در قسمت ب) نیز پی‌دی‌اواس مربوط به این ساختار پایدار دیده می‌شود. قسمت پ) و ت) نیز ساختارهای مشابه با الف) و ب) ولی بدون لحاظ کردن اس‌اوسی هستند. ۱۰۴
- شکل (۳۹.۴) نمودار انرژی جذب اتم اکسیژن در ساختار ZBBu-12×1 در جایگاه‌های فعال سطحی تعریف شده در شکل (۳۰.۴). ۱۰۶
- شکل (۴۰.۴) الف) ساختار نواری سامانه‌ی ZBBu-12×1 آلاینده شده توسط اتم اکسیژن (در موقعیت پایدار جانشینی) و در قسمت ب) نیز پی‌دی‌اواس مربوط به این ساختار. در قسمت‌های پ) و ت) نیز ساختار نواری و پی‌دی‌اواس سامانه‌ی یادشده با لحاظ کردن اس‌اوسی رسم شده است. ۱۰۶
- شکل (۴۱.۴) نمودار اختلاف بار اتم‌های ZBBu-12×1 آلاینده شده با اتم اکسیژن. ۱۰۸
- شکل (۴۲.۴) الف) شمایی از سامانه‌ی برهم‌کنشی B.O.3(B). در قسمت ب) نیز برای در نظر گرفتن شرایط مشابه با حالت برهم‌کنشی، اتم اکسیژن در فاصله‌ی ۴Å از سطح موردنظر برای ساخت یک سامانه‌ی غیر برهم‌کنشی قرار گرفته است. ۱۰۸
- شکل (۴۳.۴) نمودار پی‌دی‌اواس مربوط به اتم‌های شماره‌ی الف (۲۵ اکسیژن، ب) ۱۷ و پ) ۱۱ و ت) ۲۱ بیسموت در سامانه‌ی برهم‌کنشی ZBBu-12×1 با اکسیژن که با سامانه‌ی غیر برهم‌کنشی هم‌ارز آن مقایسه شده است. ۱۰۸
- شکل (۴۴.۴) اختلاف چگالی بار در سامانه‌ی برهم‌کنشی ZBBu-12×1-O-B2. ۱۰۹
- شکل (۴۵.۴) ساختار نواری نانو نوار ZBNR-12×1 آلاینده شده توسط اتم اکسیژن در موقعیت پایدار پل (B) بدون لحاظ کردن اس‌اوسی. ۱۰۹

فهرست جدول

صفحه	عنوان
۸۱	جدول (۱.۴): مقایسه‌ی پارامترهای ساختاری به دست آمده با دو منبع مختلف، یکی تجربی و دیگری با به‌کارگیری بسته‌ی نرم افزاری کوانتوم اسپرسو و تقریب چگالی موضعی.....

فصل اول

مقدمه‌ی عمومی

۱.۱ مقدمه:

نانو مواد با بعدهای کوچک خود دارای ویژگی‌های الکتریکی، مکانیکی، نوری و مغناطیسی جالب توجهی هستند. از این رو نامزد مناسبی در نانو الکترونیک، نانو مکانیک، نانو فوتونیک و بیوتکنولوژی محسوب می‌شوند. بیسموت شبه‌فلزی از گروه پانزده جدول تناوبی، دارای ویژگی‌های فیزیکی منحصر به فردی است. از این رو تلاش‌های بسیاری در زمینه سنتز انواع مختلفی از نانو ساختارهای آن صورت می‌گیرد. دلیل این جلب توجه را می‌توان در ویژگی‌های الکترونیکی و نوری متفاوت نانو مواد بیسموت نسبت به حالت توده‌ای آن دانست. به عنوان نمونه نانوسیم‌های بیسموت ویژگی‌های ترموالکتریکی قابل توجهی نسبت به توده‌ی خود نشان می‌دهند. این ویژگی برخلاف ویژگی توده‌ی بیسموت است که فاقد ویژگی ترموالکتریکی است. اثر ترموالکتریک اشاره به پدیده‌ای دارد که در آن اختلاف دما ایجاد یک پتانسیل الکتریکی می‌کند و یا پتانسیل الکتریکی تولید یک اختلاف دما می‌کند. نانولوله‌های دسته‌سندلی^۱ و زیگزاگ^۲ بیسموت نیز برخلاف ویژگی شبه‌فلزی توده‌ی خود دارای ویژگی نیمه‌هادی هستند. در میان تمام نانو ساختارهای بیسموت با ویژگی‌های قابل توجه، نانو نوارهای آن به عنوان ستاره‌ی درخشان این جمع شناخته می‌شوند. از این رو توجه زیادی را به سوی خود جلب نموده‌اند. بررسی‌های انجام شده، حکایت از پایداری بیش‌تر نانو نوارهای بیسموت نسبت به نانو نوارهای گرافن دارد. از سوی دیگر نانو نوارهای بیسموت با داشتن برهم‌کنش اسپین-مدار^۳ قوی (که از این پس برگرفته از مخفف انگلیسی آن (SOC) اس‌اوسی نامیده می‌شود)، دارای فاز کوانتومی اسپینی هال^۴ (یعنی عایق توپولوژیکی دوبعدی) هستند و جریان‌های لبه‌ی اسپین-قطبیده دارند. از این رو بدون نیاز به اعمال میدان یا تغییر ساختار، دارای شرایط مساعد جهت کاربرد در فن‌آوری اسپین‌ترونیک^۵ خواهند بود.

¹ Armchair

² Zigzag

³ Spin – Orbit Coupling (SOC)

⁴ Quantum Spin Hall Phase (QSH)

⁵ Spintronic

برای آشنایی با مفاهیمی چون اس اوسی، فاز کوانتومی اسپینی هال، جریان‌های لبه و فن‌آوری اسپین‌ترونیک، نیازمند آشنایی با مفهومی چون نظم توپولوژیک هستیم. نظم توپولوژیک عامل مهمی در ایجاد فازهای غیرمتداول ماده است و ارتباط تنگاتنگی با طبقه‌بندی مواد دارد [۱]. به طوری که وجود آن موجب تغییر در مبنای طبقه‌بندی مواد شد. همان‌طور که می‌دانیم فازهای متنوعی از ماده در طبیعت وجود دارد که اختلافشان ناشی از نظم متفاوت اجزای تشکیل‌دهنده آن‌ها است. در جهان کلاسیک ماده در سه فاز اصلی جامد، مایع و گاز معرفی می‌شد [۲]. ولی بعدها با ظهور فیزیک کوانتومی دسته‌بندی جدیدی از حالت‌های ماده بر مبنای نظریه‌ی لاندائو^۱ [۳] (یک نظریه‌ی عمومی برای فرموله کردن انتقال فاز پیوسته) صورت گرفت. لاندائو در سال ۱۹۴۰ حالت ماده را بر پایه‌ی شکست خودبه‌خودی تقارن معرفی کرد که گام اساسی در توسعه‌ی چنین نظریه‌ی عمومی توجه به هم‌بستگی نظم‌ها و تقارن‌ها (شکست تقارن‌ها) بوده است [۴]. جامدهای بلوری، آهن‌رباها و ابررساناها (ابررسانایی پدیده‌ای مکانیک کوانتومی با مقاومت الکتریکی صفر است که در مواد و شرایط خاص (همانند سرد شدن تا یک دمای مشخصه) رخ می‌دهد) از جمله موادی بودند که به کمک این نظریه معرفی شدند. در موارد یادشده به ترتیب تقارن‌های انتقالی^۲، چرخشی^۳ و پیمانه‌ای^۴ به‌طور خودبه‌خودی شکسته می‌شود [۵]. مثالی از شکست تقارن، تبدیل فاز مایع به جامد است. اتم‌های یک مایع دارای توزیع تصادفی هستند. در نتیجه با اعمال تغییر فاصله بر روی اجزای تشکیل‌دهنده‌ی آن نیز، مایع شکل خود را حفظ می‌کند. به عبارت دیگر گفته می‌شود فاز مایع دارای تقارن انتقالی پیوسته^۵ است. در جریان انتقال فاز، مایع به شبکه‌ی بلوری تبدیل می‌شود که اتم‌های آن در یک آرایش منظم سامان‌دهی شده‌اند. یعنی تقارن انتقالی پیوستار به تقارن انتقالی گسسته تبدیل می‌شود که مکان اتم‌های آن تنها بافاصله‌ای معین تغییر می‌کند (مرتبه‌ای صحیح از ثابت شبکه). این تغییر یا کاهش تقارن، شکست تقارن نامیده می‌شود.

تا قبل از کشف اثر کوانتومی هال^۶ توسط کلینگ^۷ و همکارانش در سال ۱۹۸۰، فیزیک‌دان‌ها بر این باور بودند که این نظریه قادر به توصیف تمام حالت‌های ماده و انتقال فازهای میان آن‌ها است [۲]. اما مطالعه‌ی این اثر در طول ۳۰ سال گذشته منجر به الگوی طبقه‌بندی متفاوتی بر پایه‌ی نظم توپولوژیک^۸ شد [۴]. نظم توپولوژیک و یا به بیان دقیق‌تر نظم کوانتومی نوع جدیدی از نظم را بیان می‌کند که در ماده‌های کوانتومی (فازهایی که در دمای صفر مطلق وجود دارند) ظاهر می‌شود [۲]. حالت‌های منظم توپولوژیک دارای ویژگی‌های عجیبی هستند که حالت‌های مرزی به شکل کانال‌های هادی یکی از این موارد است. با توجه به این نکته که عبور الکتریسیته از این کانال‌ها با تولید گرما همراه نبوده، این ویژگی کاربرد این مواد را در ابزارهای الکترونیکی فراهم می‌کند. این حالت‌ها اولین مثال از حالت‌های کوانتومی بودند که نظریه‌ی شکست خودبه‌

¹ Landau

² Translational symmetry

³ Rotational symmetry

⁴ Gauge symmetry

⁵ Continuous translation symmetry

⁶ Hall

⁷ Von Klitzing

⁸ Topological order

خودی تقارن لاندائو قادر به توصیف آن‌ها نبود [۵]. با ظهور نظم توپولوژیک مشخص شد طبیعت غنی تر از چیزی است که نظریه‌ی شکست تقارن لاندائو توصیف می‌کند. در سال‌های گذشته گروه جدیدی از حالت‌های نظم توپولوژیک بانام حالت‌های کوانتومی اسپینی هال^۱ شناخته شده‌اند [۶]. با وجود شباهت زیاد حالت‌های کوانتومی هال و حالت‌های کوانتومی اسپینی هال، همانند برقراری جریان‌های بدون اتلاف انرژی، تفاوت‌های قابل توجهی نیز میان آن‌ها وجود دارد. به‌عنوان مثال حالت‌های کوانتومی هال در نتیجه‌ی اعمال میدان مغناطیسی خارجی قوی در دمای پایین به یک تیغه‌ی رسانای دوبعدی ایجاد می‌شوند که در نتیجه‌ی اعمال میدان، الکترون‌های توده‌ی تیغه از حرکت منع شده و در مقابل یک جریان بدون اتلاف انرژی در لبه‌های تیغه ایجاد می‌شود. در مقابل حالت‌های کوانتومی اسپینی هال از میدان مغناطیسی بی‌نیاز بوده [۵] و یک خاصیت ذاتی به نام اس‌اوسی نقش میدان مغناطیسی موثر را در آن‌ها بازی می‌کند [۶]. به‌موجب این ویژگی، حالت‌های الکترونی قابل توجهی در مرزهای هر دو فاز، به وجود می‌آید [۷]. اس‌اوسی اثری نسبی در مواد جامد است که شامل جفت شدن درجه‌ی آزادی اندازه حرکت زاویه‌ای مداری و اسپینی است. به‌موجب این برهم‌کنش، الکترون‌هایی با اسپین متفاوت، نیرویی وابسته به اسپین را احساس خواهند کرد و در دو جهت متفاوت حرکت می‌کنند [۵]. از این رو حالت‌های کوانتومی اسپینی هال یا به‌اختصار عایق‌های توپولوژیکی^۲ دوبعدی [۶] تنها اجازه‌ی عبور الکترون را در لبه داشته و توده‌ی عایق آن‌ها (ناحیه‌ی محصور بین لبه‌ها) از ترابرد الکترون‌ها جلوگیری می‌کند. به همین خاطر این گروه از مواد دارای شکاف نواری در توده و حالت‌های لبه‌ی بدون شکاف نواری و هلیکال^۳ هستند (هلیکال به این معنی که الکترون‌هایی با جهت اسپین مخالف در لبه، در دو جهت مختلف حرکت می‌کنند). این حرکت توسط عاملی چون تقارن بازگشت زمانی^۴ محافظت می‌شوند. تقارن بازگشت زمانی یا بازگشت حرکتی که اصطلاح روشن‌تری برای این مفهوم است، اولین بار توسط ویگنر^۵ در سال ۱۹۳۲ فرمول‌بندی شد. در قالب مکانیک کلاسیک این تقارن را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد. اگر از حرکت ذره‌ای از نقطه‌ی a به b و در مرحله‌ی بعدی حرکت وارونش از نقطه‌ی b به a فیلم گرفته شود و فیلم به صورت معکوس پخش شود. در این حالت تشخیص این که حرکت اصلی (a به b) یا (b به a) بوده مشکل خواهد بود. به عبارت دقیق $x(t)$ و $x(-t)$ هر دو جواب معادله‌ی حرکت نیوتن خواهند بود. چنین حرکتی دارای تقارن بازگشت زمانی است. به این معنا که نسبت به بازگشت زمان متقارن است. اما نکته‌ای که باید توجه داشت این است که در این نوع حرکت مفهوم نیروی اتلافی مانند اصطکاک جایی ندارد. در مکانیک کوانتومی تقارن بازگشت زمانی در قالب یک اپراتور پادواحد^۶ به صورت رابطه‌ی (۱-۱) تعریف می‌شود.

$$T = Ke^{\frac{i\pi\sigma_y}{2}} = Ki\sigma_y \quad (1-1)$$

¹ Quantum spin Hall state

² Topological Insulator (TI)

³ Helical

⁴ Time Reversal Symmetry (TRS)

⁵ Wigner

⁶ Antiunitary

که در آن K یک اپراتور مزدوج مختلط^۱ است و هر حالتی در سمت راست خود را مزدوج مختلط می‌کند. هم ماتریس پاولی با ساختاری مطابق با رابطه‌ی (۲-۱) است.

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad (2-1)$$

یک تعریف کلی از اپراتور واحد^۲ (U) و پادواحد (T) را می‌توان به صورت رابطه‌های (۳-۱) و (۴-۱) تعریف کرد. رابطه‌ی (۵-۱) نیز ارتباط دو اپراتور را نسبت به یکدیگر نشان می‌دهد [۸].

$$\{U|x\rangle|U|y\rangle\} = \langle x|y\rangle \quad (3-1)$$

$$\{T|x\rangle|T|y\rangle\} = \langle x|y\rangle^* = \langle y|x\rangle \quad (4-1)$$

$$T = KU \quad (5-1)$$

اپراتورهای واحد و پادواحد به ترتیب اپراتورهای خطی (O) و غیرخطی (O_A) نرمال، مطابق با رابطه‌ی (۶-۱) و (۷-۱) هستند [۹].

$$O\{a|x\rangle + b|y\rangle\} = aO|x\rangle + bO|y\rangle \quad (6-1)$$

$$O_A\{a|x\rangle + b|y\rangle\} = a^*O|x\rangle + b^*O|y\rangle \quad (7-1)$$

برای این که بیش تر با مفهوم عایق توپولوژی که دارای جریان‌های لبه‌ای حفاظت شده توسط تقارن بازگشت زمانی است آشنا شویم به معرفی جز به جز آن می‌پردازیم. واژه‌ی عایق توپولوژی مرکب از دو واژه‌ی عایق و توپولوژی است. همان‌طور که می‌دانیم عایق به تمامی ترکیباتی گفته می‌شود که وجود شکاف نواری بین ترازهای پر و خالی آن‌ها، مانع از انتقال الکترون می‌شود. نتیجه‌ی چنین شکافی فقدان هدایت الکتریکی است. از این رو ترکیب عایق، جریان الکتریکی را از خود عبور نمی‌دهد. اما منظور از توپولوژی چیست. توپولوژی شاخه‌ای از ریاضی است که به مطالعه‌ی ویژگی‌هایی از اشیاء می‌پردازد که در اثر تغییر شکل نرم مانند کشیدن و خم کردن (و نه گسستن و تشکیل پیوند) تغییر نمی‌کنند. در نهایت عایق‌های توپولوژی را از این جهت توپولوژیکی می‌نامند که ویژگی‌هایی متأثر از توپولوژی توده‌ی خود را نمایان می‌سازند. به طوری که تا زمان تغییر توپولوژی توده‌ی خود، قادرند ویژگی‌های منحصر به فرد خود را حفظ کنند. عایق‌های توپولوژیکی در ابتدا به صورت دوبعدی (با بررسی‌های نظری در سال ۲۰۰۶) پیش‌بینی شدند و به دنبال آن در مواد واقعی مانند چاه‌های کوانتومی جیوه تلورید و کادمیوم تلورید^۳ مورد بررسی قرار گرفتند [۱۰] که در حدود یک سال بعد هم با روش‌های تجربی تایید شدند [۵]. به دنبال کشف حالت‌های کوانتومی اسپینی هال یا عایق‌های توپولوژی دوبعدی، عایق‌های توپولوژیکی سه‌بعدی برای اولین بار، در آلیاژهای بیسموت آنتیمونید^۴ شناخته شدند. اما تحقیقات گسترده در مورد عایق‌های توپولوژی سه‌بعدی، با کشف رفتار توپولوژیکی در Bi_2Se_3 و Bi_2Te_3 به اوج خود رسید [۶]. عایق‌های توپولوژیکی سه‌بعدی نیز مشابه با نسخه‌ی دوبعدی خود دارای حالت‌های سطحی رسانای (فلزی) هلیکال و توده‌ی عایق هستند که تفاوت حالت‌های سطحی دوبعدی

¹ Complex conjugate

² Unitary

³ HgTe/CdTe

⁴ $\text{Bi}_{1-x}\text{Sb}_x$

با حالت‌های لبه یک‌بعدی در بعدهای آن‌ها برای انتقال الکترون است. به طوری که، در حالت‌های سطحی عایق‌های توپولوژی سه‌بعدی، الکترون‌ها توانایی حرکت را تنها در دو بعد سامانه‌ی موردنظر دارند ولی در حالت‌های لبه تنها حرکت الکترون در یک بعد امکان‌پذیر است. ویژگی جالب و منحصر به فرد حالت‌های سطحی در عایق‌های توپولوژی سه‌بعدی، مشابه با حالت‌های لبه در عایق‌های توپولوژیکی دو‌بعدی، برقراری جریان‌های یک‌طرفه و بدون اتلاف انرژی در آن‌ها است. دلیل این امر را چنین می‌توان تفسیر نمود که بار-های الکتریکی در مرزهای عایق‌های توپولوژیکی برخلاف مواد معمولی، هنگام برخورد به ناخالصی‌ها حرکت روبه‌جلو را به جای بازگشت پخش^۱ (پس‌پراکندگی) در پیش می‌گیرند. این حرکت نتیجه‌ای از قانون بقای اندازه حرکت زاویه‌ای^۲ است. به موجب قانون یادشده، بازگشت پخشی، یعنی چرخش اسپین در اثر چرخش تکانه (که نتیجه‌ی قفل شدن این دو اندازه حرکت زاویه‌ای است) تنها در حضور ناخالصی‌های مغناطیسی یا میدان مغناطیسی خارجی رخ می‌دهد [۷]. در نتیجه‌ی نبود بازگشت پخشی، جریان‌های ابقایی یا جریان‌هایی با اتلاف انرژی اندک در مرزهای این مواد دیده می‌شود [۱۱]. به موجب چنین جریان ابقایی طیف گسترده‌ای از کاربردها، از الکترونیک تا تولید انرژی در این مواد نوید داده می‌شود و قادر به ساخت ابزارهایی خواهیم بود که کارکرد آن‌ها با تولید گرما همراه نباشد. با این تفاسیر، حالت‌های سطحی در عایق‌های توپولوژیکی تضمین‌کننده‌ی هدایت الکتریکی بالا در این مواد است. با وجود چنین ویژگی‌هایی، عایق‌های توپولوژیکی به عنوان ستاره‌ی درخشان فیزیک ماده چگال شناخته می‌شوند. علاوه بر الکترونیک، زمینه‌ی اپتوالکترونیک^۳ نیز به تازگی خود را در میان کاربردهای این مواد جای داده است. دلیل این توجه، ویژگی‌های انتقالی منحصر به فرد و وجود رابطه‌ی خطی میان انرژی و تکانه، در ساختار الکترونی این ترکیب‌ها است. این ویژگی با عنوان ساختار الکترونی دیراک در عایق‌های توپولوژیکی شناخته می‌شود. عایق‌های توپولوژیکی با داشتن چنین خصوصیتی مشابه با گرافن، رقیب قدرتمندی برای آن در کاربردهای فوتونیک و اپتوالکترونیک خواهند بود. از کاربردهای عایق توپولوژیکی در زمینه‌ی اپتوالکترونیک می‌توان به کاربرد آن در ساختار هادی-های شفاف و آشکارسازهای باند پهن اشاره کرد. خاصیت ترموالکتریکی در این قبیل مواد از دیگر زمینه‌های جلب توجه آن‌ها است. به طوری که تمامی عایق‌های توپولوژیکی را می‌توان به عنوان مواد ترموالکتریک معرفی کرد. مواد ترموالکتریک دارای شرایط لازم برای بروز اثر ترموالکتریک هستند، اثری که در آن اختلاف دما موجب ایجاد پتانسیل الکتریکی و یا پتانسیل الکتریکی موجب ایجاد اختلاف دما می‌شود. شکاف نواری بهینه برای کاربردهای ترموالکتریک، یک مرتبه بزرگ‌تر از انرژی گرمایی اتاق است. از این رو نیمه‌هادی‌هایی با شکاف نواری باریک، بهترین مواد ترموالکتریک در دمای اتاق خواهند بود. در مورد عایق‌های توپولوژیکی اس‌اوسی با قدرت کافی موجب تغییر ساختار نواری و به عبارتی افزایش شکاف نواری در توده‌ی آن‌ها می‌شود. قدرت این برهم‌کنش با افزایش جرم اتمی افزایش می‌یابد. از این رو ترکیباتی شامل عناصر (نیمه)

¹ Back scattering

² Law of conservation of angular momentum

³ Optoelectronics

سنگین و دارای شکاف نواری مناسب، بهترین گزینه برای کاربردهای ترموالکتریک خواهند بود. در نهایت نیز زمینه‌ی اسپین‌ترونیک کاربرد مهم و قابل توجه دیگر در عایق‌های توپولوژیک است [۱۲]. با توجه به بافت اسپینی منحصربه‌فرد این مواد، جریان‌های هلیکال سطحی، چگالی اسپینی خالصی را در این مواد به وجود می‌آورد که می‌تواند در ساخت کارت‌های حافظه و دستگاه‌های گشتاور اسپینی^۱ مفید واقع شود [۷].

گذشته از این موارد جستار عایق‌های توپولوژیک یک مسأله‌ی جدید، چالش برانگیز و در حال توسعه است. با وجود شناخت خواص اساسی آن‌ها، هنوز در مراحل ابتدایی توسعه‌ی آن‌ها قرار گرفته‌ایم [۴] به گونه‌ای که هنوز بسیاری از اثرات شگفت‌انگیز آن‌ها در مواد توپولوژیک فعلی تحقق نیافته است. با وجود کشف ساختارهای توپولوژیک دوتایی همانند Bi_2Se_3 و Bi_2Te_3 با شکاف نواری بزرگ (در حدود 0.3 eV) [۱۳]، طبیعت لایه‌لایه و حضور نیروهای واندروالسی ضعیف، جذب اتم‌های خارجی در ساختار آن‌ها را تسهیل می‌کند. از این رو امکان دسترسی به ساختارهای پایدار از این ترکیب‌ها تا حدودی مشکل به نظر می‌رسد. علاوه بر آن وجود این ویژگی‌ها، اندازه‌گیری ترابرد در این مواد را نیز با مشکل روبه‌رو می‌کند. وجود این مشکلات زمینه‌ساز جستجوی بیشتر در مورد مواد توپولوژیک جدید با ویژگی‌های خاص شد. موادی که دارای خواص الکترونی، فیزیکی و شیمیایی بهتری نسبت به مواد توپولوژیک فعلی باشند. در این مرحله ترکیب‌های سه‌تایی با ساختار III-V-VI_2 معرفی شد که اعداد یونانی سه، پنج و هفت می‌تواند به ترتیب نشان‌دهنده‌ی ترکیبی از عناصر $(\text{III} = \text{In, Ti})$ و $(\text{V} = \text{Sb, Bi})$ یا $(\text{VI}_2 = \text{S, Se, Te})$ در جدول تناوبی باشد [۱۴]. ترکیب‌های سه‌تایی گروه جدیدی از عایق‌های توپولوژیکی با شکاف نواری مشابه با ساختارهای دوتایی، ولی ویژگی‌های فیزیکی بهتری نسبت به آن‌ها هستند [۱۵]. از جمله ویژگی‌های منحصربه‌فرد ترکیب‌های سه‌تایی می‌توان به مشاهده‌ی دمای انتقال ابررسانایی اشاره کرد که در نتیجه‌ی نوع ویژه‌ی از آلابیدن حامل‌های بار به وجود می‌آید. با ایجاد حالت‌های ابررسانا در توده، حالت‌های سطحی نیز، به دلیل اثر مجاورتی ابررسانا می‌شوند. این امر تحقق ابررسانایی توپولوژیکی، یکی از اهداف دور فیزیک ماده چگال را نوید می‌دهد. ابررساناهای توپولوژیک دارای شکاف نواری در توده و حالت‌های سطحی محافظت‌شده‌ی توپولوژیک شامل فرمیون‌های مایورانا^۲ هستند (فرمیون‌هایی که به‌عنوان پادذره‌ی خود عمل می‌کنند) [۱۵]. از سوی دیگر پیش‌بینی شده است که در فصل مشترک یک ابررسانای معمولی و عایق توپولوژیک نیز بتوان، فرمیون‌های مایورانا را ایجاد کرد [۱۶]. پیش‌بینی شده است با تحقق فرمیون‌های مایورانا و سپس مهار و مهندسی آن‌ها بتوان کامپیوترهای کوانتومی توپولوژیک^۳ ساخت، کامپیوترهایی که به‌طور شگفت‌آوری از هرگونه خطا ایمن هستند و انقلاب بزرگی را در عرصه‌ی پردازش اطلاعات به وجود خواهند آورد [۱۷]. در چند سال گذشته بررسی‌های نظری و تجربی مهمی توسط پژوهش‌گران علم شیمی در پیوند با عایق‌های توپولوژیک آغاز شده است که در بخش پیشرو به چند مورد از آن‌ها اشاره می‌شود. به‌عنوان نمونه، استفاده از

¹ Spin torque

² Majorana fermions

³ Topological quantum computers